

Zeitschrift für Kristallographie

International Journal for Structural, Physical,
and Chemical Aspects of Crystalline Materials

Editors-in-Chief

M. Buerger, Cambridge, MA · S. Haussühl, Köln
H. G. von Schnering, Stuttgart

Editorial Board

G. E. Bacon, Sheffield · E. F. Bertaut, Grenoble
U. K. E. Bonse, Dortmund · P. Hartman, Utrecht
E. Hellner, Marburg/Lahn · F. Liebau, Kiel
A. Niggli, Zürich · M. Renninger, Marburg/Lahn
K. Schubert, Stuttgart · L. A. Shuvalov, Moscow
Y. Takéuchi, Tokyo

Volume 152 1980



Akademische Verlagsgesellschaft · Wiesbaden

© Akademische Verlagsgesellschaft Wiesbaden 1980. — Printed in Germany. — Die in dieser Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Übersetzung, Nachdruck, Vervielfältigung auf photomechanischem oder ähnlichem Wege oder im Magnettonverfahren, Vortrag, Funk- und Fernsehsendung sowie Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen — auch auszugsweise — bleiben vorbehalten. All rights reserved (including those of translations into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form, by photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publishers. Werden von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen einzelne Vervielfältigungsstücke im Rahmen des § 54 UrhG hergestellt und dienen diese gewerblichen Zwecken, ist dafür eine Vergütung gem. den gleichlautenden Gesamtverträgen zwischen der Verwertungsgesellschaft Wort (ehemals Inkassostelle für urheberrechtliche Vervielfältigungsgebühren GmbH), Goethestr. 49, D-8000 München 2, und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V., dem Gesamtverband der Versicherungswirtschaft e.V., dem Bundesverband deutscher Banken e.V., dem Deutschen Sparkassen- und Giroverband und dem Verband der Privaten Bausparkassen e.V., an die VG Wort zu entrichten. Die Vervielfältigungen sind mit einem Vermerk über die Quelle und den Vervielfältiger zu versehen. Erfolgt die Entrichtung der Gebühren durch Wertmarken der VG Wissenschaft, so ist für jedes vervielfältigte Blatt eine Marke im Wert von DM 0,40 zu verwenden.

Herstellung: Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden

Vol. 152 No. 1/2 1980

I. Ueda, M. Suzuki

The crystal and molecular structures of dichloro(N^1, N^1 -dimethyl-(S)-1,2-propanediamine)-palladium(II) hemihydrate and dichloro-(N^1, N^1 -diethyl-(S)-1,2-propanediamine)palladium(II) 1

K. Sahl

Refinement of the crystal structure of bicchulite,
 $Ca_2[Al_2SiO_6](OH)_2$ 13

W. B. Pearson

Dimensional analysis of phases having the $BaCd_{11}$, $NaZn_{13}$ and $BaHg_{11}$ structures: study of the influence of variable atomic parameters on changes of unit-cell dimensions 23

J. Jager, W. Otterbein

Die Kristallstruktur von 1-*p*-Chlorophenyl-3,4-propano-4,5,6,7-tetrahydroindazol-5,5-dicarbonsäuredimethylester
($C_{20}H_{21}ClN_2O_4$) 37

M. Schulte-Kellinghaus, V. Krämer

Die Kristallstruktur des Antimon-Sulfid-Chlorids $Sb_4S_5Cl_2$ 47

V. Amirthalingam, M. D. Karkhanavala, U. R. K. Rao

Crystallographic phase transition in $NaBF_4$ 57

H. Krischner, H. E. Maier, O. Baumgartner

Die Kristallstruktur des $K_2Ca(N_3)_4 \cdot 4 H_2O$ 63

H. Weitzel, H. Schröcke

Kristallstrukturverfeinerungen von Euxenit, $Y(Nb_{0.5}Ti_{0.5})_2O_{69}$, und M-Fergusonit, $YNbO_4$ 69

H. Burzlaff, H.-H. Grube

Strukturverfeinerung und Zwillingsgesetz am Zn-D' Ansit 83

K. Kihara

On the split-atom model for hexagonal tridymite 95

L. Arnberg, S. Westman

A discussion of the ordering in some vacancy-containing gamma brasses 103

G. P. Voutsas, P. J. Rentzeperis

The crystal structure of the paraelectric bismuth thiochloride, $BiSCl$ 109

K. Kosten, H. Arnold

Die III-V-Analoga des SiO_2 119

M. Kurahashi, P. Engel, W. Nowacki

The crystal structures of 4-haloquinuclidinium perchlorates 135

M. Kurahashi, P. Engel, W. Nowacki

The crystal structures of quinuclidinium chloride and
4-haloquinuclidinium chlorides 147

Short Communications

U. C. Sinha, S. Ojha

Crystal data for zinc bis (hydrogen malonate) dihydrate 157

B. 'Femi-Onadeko

Acetatobis (triphenyl phosphine) silver (I) 159

Vol. 152 No. 3/4 1980

H. Bartl, H. Küppers

Neutronenbeugungsuntersuchung der extrem kurzen
Wasserstoffbrücke im Kupfer-Dihydrogen-Diphthalat-Dihydrat 161

P. Engel, R. Sobczak, L. A. Paquette

Towards the synthesis of dodecahedrane. II. The crystal and
molecular structure of tetrahydro-C₁₆-hexaquinacene-1,9-dione
169

S. Natarajan, J. K. Mohana Rao

Crystal structure of bis(glycine)calcium(II)dichloride tetrahydrate
179

M. Martinez-Ripoll, J. Fayos

On the absolute configuration determination by X-ray diffraction
data 189

W. Jamroz

Semi-classical model of the electrooptic Kerr effect for anisotropic
media 195

E. Dowty

Atomic structure of Carlsbad and Carlsbad-albite twins in feldspar
201

T. Araki

Crystal structure of a cesium aluminosilicate, Cs[AlSi₅O₁₂] 207

**W. G. M. van den Hoek, G. Bokkers, H. Krabbendam,
A. L. Spek, J. Kroon**
Direct methods and hypersymmetry: Structure determination of
exaltone phenylsemicarbazone with low-order diffraction data **215**

A. Whitaker
The crystal structure of a second polymorph (β) of C.I. Pigment
Red 1, 1-[(4-nitrophenyl)azo]-2-naphthol **227**

E. F. Paulus
Molecular and crystal structure of Forskolin **239**

S. Deganello
The basic and derivative structures of calcium oxalate monohydrate
247

A. Perez Salazar, F. H. Cano, S. Garcia-Blanco
Crystal structure of 2-pyridylneaniline silver nitrate (AGPANO_3)
253

Y. Takéuchi, F. Nishi, J. Maki
Crystal-chemical characterization of the $3\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Na}_2\text{O}$ solid-
solution series **259**

K. Itoh, H. Matsunaga
A study of the crystal structure in ferroelectric SbSI **309**

S. L. Shoemaker, E. Kostiner, J. B. Anderson
The crystal structure of potassium copper(II) phosphate KCuPO_4 , an
example of a three-dimensional network **317**

Short Communication

D. L. Sastry, M. V. Rajasekharan, K. V. S. Rama Rao
An X-ray study of strontium bromate monohydrate **333**

Digitized by the Internet Archive
in 2023

Zeitschrift für Kristallographie

International Journal for Structural, Physical,
and Chemical Aspects of Crystalline Materials

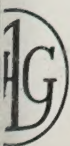
Editors-in-Chief

M. Buerger, Cambridge, MA · S. Haussühl, Köln
H. G. von Schnering, Stuttgart

Editorial Board

G. E. Bacon, Sheffield · E. F. Bertaut, Grenoble
U. K. E. Bonse, Dortmund · P. Hartman, Utrecht
E. Hellner, Marburg/Lahn · F. Liebau, Kiel
A. Niggli, Zürich · M. Renninger, Marburg/Lahn
K. Schubert, Stuttgart · L. A. Shuvalov, Moscow
Y. Takéuchi, Tokyo

Volume 153 1980



Akademische Verlagsgesellschaft · Wiesbaden

Vol. 153 No. 1/2 1980

P. Buck

M. Renninger 75 Jahre 1

K.-F. Hesse, F. Liebau

Crystal chemistry of silica-rich Barium silicates. I. Refinement of the crystal structures of $\text{Ba}_4[\text{Si}_6\text{O}_{16}]$, $\text{Ba}_5[\text{Si}_8\text{O}_{21}]$ and $\text{Ba}_6[\text{Si}_{10}\text{O}_{26}]$, silicates with triple, quadruple and quintuple chains 3

M. Czank, P. R. Buseck

Crystal chemistry of silica-rich Barium silicates. II. Electron microscopy of barium silicates containing multiple chains 19

K.-F. Hesse, F. Liebau

Crystal chemistry of silica-rich Barium silicates. III. Refinement of the crystal structures of the layer silicates $\text{Ba}_2[\text{Si}_4\text{O}_{10}]$ (I) (Sanbornite), and $\text{Ba}_2[\text{Si}_4\text{O}_{10}]$ (h) 33

E. F. Paulus

Molecular and crystal structure of 1-benzyl-7-desacetyl-7-bromoisobutyryl-forskolin. Absolute configuration of Forskolin 43

B. Pałosz

A new method of symbolic description of polytypic structures of MX_2 -type compounds — xyz notation, description of stacking faults — *t-o-f* notation 51

F. H. Herbstein, M. Kapon

Crystal structures of the triiodide salt-molecule complexes $(\text{Xanthotoxin})_2 \cdot \text{KI}_3$ and $(\text{Glycine})_4 \cdot \text{KI}_3$ 73

G. Will, M. O. Bargouth

Neutron diffraction study of $\beta\text{-SnF}_2$ 89

C. S. Strom

Graph-theoretic construction of periodic bond chains.
I. General case 99

J. D. Jarratt

Stability of symmetry in crystal lattice hyperplanes 115

K. Aurivillius, C. Stålhandske

A reinvestigation of the crystal structures of HgSO_4 and CdSO_4 121

H. Völlenkne

Die Kristallstruktur von $\text{Li}_6\text{Ge}_2\text{O}_7$ und ihre Beziehung zu den Nachbarphasen Li_4GeO_4 und Li_2GeO_3 131

A. G. Nord, T. Stefanidis

The cation distribution in two $(\text{Co}_9\text{Mg})_3(\text{PO}_4)_2$ solid solutions 141

Vol. 153 No. 3/4 1980

H. Burzlaff, H. Zimmermann

On the choice of origins in the description of space groups 151

K. Dehnicke, N. Krüger, R. Kujaneck, F. Weller

$\text{Ph}_4[\text{MoNBr}_4]$; Darstellung, IR-Spektrum und Kristallstruktur 181

E. Herdtweck, D. Babel

Verfeinerung der Kristallstrukturen von K_2ZnF_4 und $\text{K}_3\text{Zn}_2\text{F}_7$ 189

V. Massa

Die Kristallstruktur von $\beta\text{-Li}_3\text{VF}_6$ 201

P. Köhl, D. Reinen, G. Decher, B. Wanklyn

Strukturelle Modifikationen von FeZrF_6 211

T. Debaerdemaeker

The crystal and molecular structure of Tricarbonyl(Triphenylphosphonium cyclopentadienylidene)chromium 221

R. Allmann, A. Kutoglu, A. Waśkowska

Die Kristallstruktur des Dicarbonyl[1-3 η -(2,3-dimethyl-1-butenyl)](triphenylphosphan) cobalts 229

H. Guth, G. Heger, S. Klein, W. Treutmann, C. Scherlinger

Strukturverfeinerung von Harnstoff mit Neutronenbeugungsdaten bei 60, 123 und 293 K und X-N- und X-X(1 s²)-Synthesen bei etwa 100 K 237

E. Koch, W. Fischer

Calculation of volume increments for organic compounds by means of Dirichlet domains 255

L. Born

Die Kristall- und Molekülstruktur von 1,5-Dimethyl-3-isopropyl-6-phenyl-1,2,3,5-tetrahydro[1,2,4]thiadiazolo [5,1-e] [1,2,4]thiadiazol-4-S^{IV}-2-thion **265**

J. Strähle, W. Hiller, E. Eitel, D. Oelkrug

Die Strukturchemie der Kupfer(I) Halogenid-Lewisbase Addukte. Darstellung und Kristallstruktur von (CuI)₂ · (2-Methylpyridin) **277**

B. Krebs, G. Henkel, H.-J. Dinglinger, G. Stehmeier

Neubestimmung der Kristallstruktur von Trithiokohlensäure α-H₂CS₃ bei 140 K **285**

K.-F. Tebbe

Untersuchungen an Polyhalogeniden. I. Die Kristallstruktur des Tetraaminzink(II)-Hexaiodids, [Zn(NH₃)₄] (I₃)₂ **297**

U. Thewalt, H.-P. Klein

Strukturchemie Titan-Organischer Verbindungen: Die Struktur von Bis(π-cyclopentadienyl)bis(trifluormethansulfonato)-titan(IV) **307**

R. Domesle, R. Hoppe

The crystal structure of Ca₂AlF₇ **317**

S. Haussühl, F. Wallrafen, K. Recker, J. Eckstein

Growth, elastic properties and phase transition of orthorhombic Li₂Ge₇O₁₅ **329**

W. Hönle, H. G. v. Schnering

Cu₄SnP₁₀, a compound with decaphospha-adamantane anions P₁₀⁶⁻ and four-center [SnCu₃] clusters **339**

© Akademische Verlagsgesellschaft Wiesbaden 1980. — Printed in Germany. — Die in dieser Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Übersetzung, Nachdruck, Vervielfältigung auf photomechanischem oder ähnlichem Wege oder im Magnettonverfahren, Vortrag, Funk- und Fernsehsendung sowie Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen — auch auszugsweise — bleiben vorbehalten. All rights reserved (including those of translations into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form, by photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publishers. Werden von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen einzelne Vervielfältigungsstücke im Rahmen des § 54 UrhG hergestellt und dienen diese gewerblichen Zwecken, ist dafür eine Vergütung gem. den gleichlautenden Gesamtverträgen zwischen der Verwertungsgesellschaft Wort (ehemals Inkassostelle für urheberrechtliche Vervielfältigungsgebühren GmbH), Goethestr. 49, D-8000 München 2, und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V., dem Gesamtverband der Versicherungswirtschaft e.V., dem Bundesverband deutscher Banken e.V., dem Deutschen Sparkassen- und Giroverband und dem Verband der Privaten Bausparkassen e.V., an die VG Wort zu entrichten. Die Vervielfältigungen sind mit einem Vermerk über die Quelle und den Vervielfältiger zu versehen. Erfolgt die Entrichtung der Gebühren durch Wertmarken der VG Wissenschaft, so ist für jedes vervielfältigte Blatt eine Marke im Wert von DM 0,40 zu verwenden.

Herstellung: Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden
